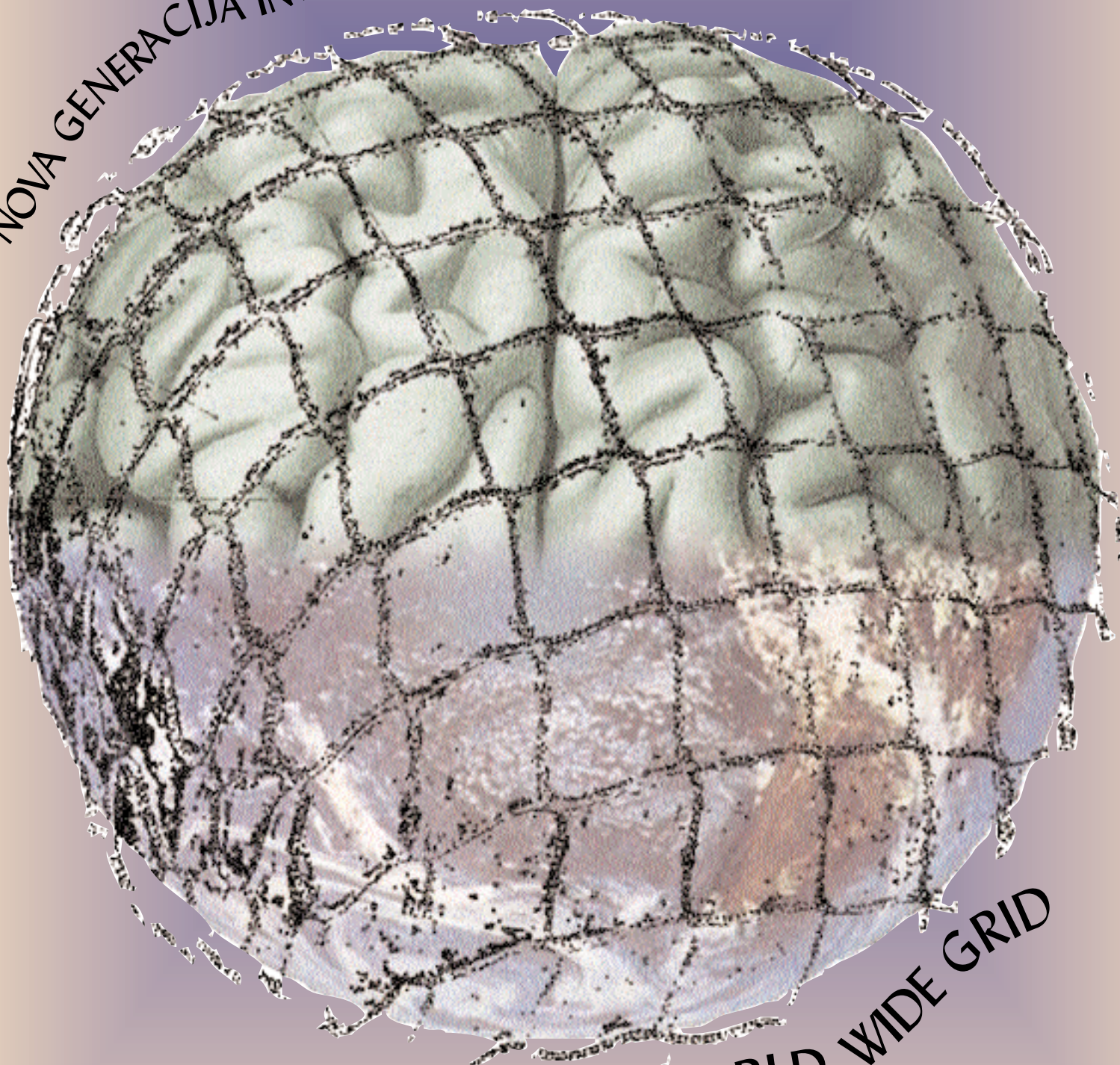


Ruđer

Glasilo djelatnika Instituta "Ruđer Bošković", studeni 2001. broj 11

NOVA GENERACIJA INTERNETA



WORLD WIDE GRID

U ovom broju:

M. Jurin:

Uvodnik glavnog
urednika2

I. Šlaus:

Društvena uloga
Instituta3

K. Skala:

Zalet prema
World Wide Grid-u . . .5

N. Pavković:

Paralelno računanje . . .9

K. Gall-Trošelj:

ICMAN11

Nagrade12

Na naslovnici:
Simbioza cerebrum-globus
WWG
design Skala

Sadašnje Uredništvo pripremilo je i izdalo svoj prvi broj glasila Ruđer za studeni 2000. godine. U svom novom obliku glasilo je dakle napunilo prvu godinu života. To je približno vrijeme kada dijete prohoda, te kada na torti puše u svoju prvu svječicu. Vjerujem da je ovo "naše dijete" prepoznatljivo u Institutu, a kako bi se što naglašenije razvijalo potrebno je da redovitije izlazimo, te da nam se i dalje, ali češće i obilnije, javljate s priložima. Uredništvo će, naravno, i dalje nastojati prikupljati zanimljive teme iz naše svakodnevnice u ovom razdoblju kada želimo stvoriti odgovarajući profil našeg Instituta.

U ovom broju na početku donosimo tekst našeg akademika Ive Šlause pod naslovom Društvena uloga Instituta "Ruđer Bošković". Naglašava da su najveće bogatstvo svake zemlje - a naročito Hrvatske - njeni ljudi, kreativni ljudi, koji su društveno angažirani. Znanstveno-istraživačka djelatnost je temelj, pokretač i jamac sveukupnog, a posebno gospodarskog razvitka, a najbolji je način integracije svake zemlje u međunarodne asocijacije. Institut stoga mora biti među najboljima u Europi što znači: biti međunarodni centar izvrsnosti, ostvariti visoku razinu znanstvene produktivnosti, injicirati nove ideje i ostvariti značajne društvene projekte, te biti središte u koje dolaze mladi ljudi jer znaju da će tu najviše naučiti i najbrže napredovati. Institut mora i može pronaći najbolje načine ustrojstva znanstvenoistraživačkog rada i obrazovnog sustava koji moraju biti fleksibilni i maksimalno djelotvorni.

U ovom su broju potom dva članka iz tematike informatike i računarstva. Dr. Karolj Skala u članku "Zalet prema World Wide Grid-u" govori o projektnom radu Računalnog centra Instituta o završavanju projektiranja magistralne optičke mreže između 20 objekata s pripadajućom aktivnom opremom. Povezivanjem superračunala, što je započelo 1995. godine u Americi, stvara se World Wide Grid ili Grid sustav. U izgradnju nove Grid paradigme u svijetu se ulažu znatna sredstva. Hrvatska, iako

nešto kasni u pokretanju nacionalnog projekta na tu temu, zahvaljujući dobroj mrežnoj infrastrukturi između pojedinim institucija može brzo napredovati s Grid tehnologijom i priključivanjem na DataGrid i EuroGrid projekte. Ističe se značaj i perspektiva Grid-a u pogledu suvremenog znanstvenoistraživačkog rada i vrednuje se ta strateška orijentacija.

Tu je i prilog Nikole Pavkovića, studenta koji radi u Računalnom centru Instituta, o paralelnom računanju. Upoznaje nas s operacijskim sustavom na clusteru *grozd.irb.hr*, koji je adaptirana verzija RedHat Linuxa v7.1 prilagođena za rad u distribuiranim/paralelnim sustavima. Prikazuje nadalje problematiku programske podrške i administracije sustava s naglaskom na sustav iz korisnikove perspektive. Posebno prikazuje po čemu se cluster razlikuje od skupa neovisnih računala, te opisuje paralelno programiranje.

Uz ova dva rada iz računarstva tu je kratki prikaz dr. Koraljke Gall-Trošelj o 1st International Conference on Mechanisms of Action of Nutraceuticals održanom u Cavtatu od 14. do 19. listopada 2001. godine. Organizatori ove konferencije bili su dr. K. Pavelić iz Instituta, Dr. M. Čolić iz SAD-a i dr. H. Seitz iz Njemačke, a razmatrana je problematika nutraceutika u kemoprevenciji raka, u kardiološkoj problematici, kod neurodegenerativnih bolesti, te u šećernoj bolesti. Nadalje, lijepo je kad priznanja i nagrade dođu u prave ruke. Tako je dr. Jadranki Pečar-Ilić pripala srebrna plaketa "Josip Lončar" Fakulteta elektrotehnike i računarstva za istaknutu doktorsku disertaciju u 2001. godini. Nadalje, voditeljica naše knjižnice mr. sc. Jadranka Stojanovski osvojila je treće mjesto u natjecanju "Digitalne knjižnice i informacijska znanost". Čestitke našim dobitnicama! Na kraju tu je i naša redovna rubrika o kadrovskim promjenama u Institutu tijekom studenog 2001. godine.


Glavni urednik
Mislav Jurin

impressum:

Glasilo djelatnika
Instituta "Ruđer Bošković"
Bijenička c. 54, 10 002 Zagreb
tel: +385 (0)1 4561 111,
fax: 4561 111
e-mail: rudjer@rudjer.irb.hr
URL: <http://www.irb.hr>

Glavni urednik: Mislav Jurin
Tehnički urednik: Karolj Skala

Uredništvo: Velimir Bardek
Dunja Čukman
Koraljka Gall-Trošelj
Kata Majerski
Iva Melinščak-Zlodi
Tvrto Smital
Jadranka Stojanovski

Digitalna obrada i izvedba:
Institut Ruđer Bošković
Grafički fakultet u Zagrebu

Izlazi mjesečno

Došli u Institut tijekom studenog 2001. godine:

Dragomira Majhen dipl. inž. biologije; dr. sc. Stjepan Marčelja; Vesna Musani dipl. inž. biologije; Marijana Šestan dipl. inž. kemije; Boris Zimmermann dipl. inž. kem. tehnologije; Vinko Zlatić dipl. inž. fizike; Nikolina Udiković dipl. inž. biotehnologije.

Otišli iz Instituta tijekom studenog 2001. godine:

Renata Povrženić; Dolores Smoljan.

Izbori u zvanja tijekom studenog 2001. godine

mlađi asistent: Zvonimir Bokulić, Matija Harcet, Anita Kriško, Dragomira Majhen, Vesna Musani, Marijana Šestan, Nikolina

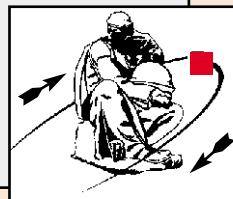
Udiković, Boris Zimmermann, Vinko Zlatić.
znanstveni suradnik: Jelena Veljković, Biserka Žinić.

Disertacije izrađene u Institutu i obranjene tijekom studenog 2001. godine.

Aleksandar Višnjevac: Stereokemija kiralnih 1,4-benzodiazepin-2-ona i njihovih metalnih kompleksa, voditeljica B. Kojić-Prodić, obrana 08. 11. 2001.

Diplomski radovi izrađeni u Institutu i obranjeni tijekom studenog 2001. godine.

Anita Kriško: Tiolske skupine lipoproteina male gustoće iz ljudske plazme, voditeljica G. Pifat - Mrzljak, obrana 22. 11. 2001.

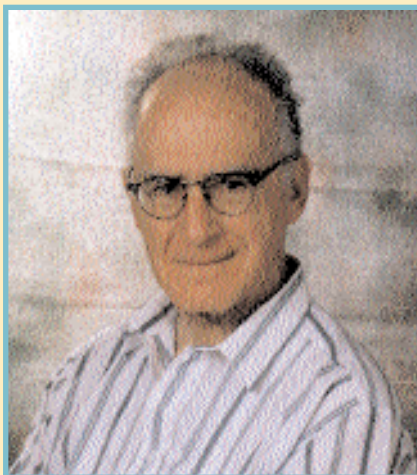


DRUŠTVENA ULOGA INSTITUTA "RUĐER BOŠKOVIĆ"

Najveće bogatstvo svake zemlje - a naročito Hrvatske - su njeni ljudi, kreativni ljudi, ljudi društveno angažirani. Među kreativnim djelatnostima posebno se ističe znanstveno-istraživačka djelatnost, koja je temelj, pokretač i jamac sveukupnog, a posebno gospodarskog razvitka. Temeljna karakteristika znanosti je njen međunarodni karakter, te je tako znanstveno-istraživačka djelatnost najbolji način integracije je svake zemlje u međunarodne asocijacije - u našem slučaju u EU, jer je naša istraživačka djelatnost stalno dio međunarodne znanosti, prepoznatljiva i ispravno vrednovana.

Nažalost većina institucija sustava razorena je posebno tijekom posljednjih deset godina. Točno je da Hrvatska ima izuzetne znanstvenike, ali znanstveni sustav i sustav visokog obrazovanja su razoreni. Isto vrijedi za zdravstvo, za sredstva javnog informiranja - jednom riječju za sve institucije društva. Preciznije, institucije postoje ali su uništene i stoga je promjene izuzetno teško provesti. Nažalost, to se odnosi djelomično i na Institut "Ruđer Bošković", koji je najveća interdisciplinarna i multidisciplinarna znanstveno-istraživačka organizacija u Hrvatskoj.

Prva i glavna obveza svih nas je učiniti da Institut "Ruđer Bošković" postane jedan od najboljih znanstveno-istraživačkih instituta u Europi. To jest moguće - jer smo npr. 1957. godine među prvima u Europi uveli postdiplomski studij, a tada i sve do konca 60-tih veza između obrazovanja i istraživanja bila je odlična, pred 30-tak godina ostvarili smo odlično usmjerenje prema ekologiji i oceanologiji, tada smo bili jedan od najvećih proizvođača radiofarmaceutika i nuklearnih podataka, itd, itd. Danas bi to trebalo biti lakše nego onda - jer je uloga fundamentalnih znanosti još važnija, jer smo direktnije i morali bi biti bolje povezani sa svijetom. Ali i teže - jer smo postali apatični, izgubili smo nadu i vjeru, mnogo godina smo se usmjeravali na prošlost.



NAJVEĆE BOGATSTVO SVAKE ZEMLJE - A NAROČITO HRVATSKE - SU NJENI LJUDI, KREATIVNI LJUDI, LJUDI DRUŠTVENO ANGAŽIRANI.

Društvena uloga Instituta "Ruđer Bošković" je upravo to da bude jedan od najboljih znanstveno-istraživačkih središta u Europi. Znanost nije nikada bila, a danas pogotovo nije društveno izolirana. Znanstveno-istraživačka djelatnost je danas temeljna politička snaga društva - koja nadilazi ali i utječe na sve stranačke rasprave i nadmetanja. Biti među najboljima u Europi znači:

- Biti međunarodni centar izvrsnosti.
- Ostvariti visoku razinu znanstvene produktivnosti koja se ogleda u pozivima za uvodna i pozvana predavanja na međunarodnim konferencijama, u revijskim člancima, u vodećoj ulozi u međunarodnim asocijacijama. Sve su to pred dvadesetak godina ostvarivali suradnici IRB, a danas čak i

neki naši znanstveni savjetnici nisu međunarodno prepoznatljivi.

- Iznositi inicijative, nove ideje, ostvariti značajne društvene projekte, biti društveno prepoznatljiv i imati društveno priznanje. Npr. koncem 80-tih pokrenuli smo projekt "Kako uključiti u znanstveni program Hrvatske našu diasporu", bili smo nosioci razvoja oceanologije i molekularne genetike, te smo aktivno doprinosili suradnji među znanstvenim institutima kroz Zajednicu instituta i sudjelovali smo u nastavi na sva četiri sveučilišta. Institut koji je vrlo sličan našem - Institut "Jožef Stefan" je sada postao osnivač novog univerziteta u Sloveniji i pokrenuo je International Center for Sustainable Development.

- Biti središte u koje dolaze mladi jer znaju da će tu najviše naučiti i najbrže napredovati. Nekada su znanstvenici na IRB izabirani u zvanje znanstvenog savjetnika kada još nisu imali ni 40 godina, a danas biramo u visoka zvanja pred odlazak u mirovinu kao socijalnu mjeru.

Republika Hrvatska započela je izradu strategije svog razvitka. Posebnu ulogu ima strategija razvitka znanosti. Strategija razvitka znanosti nije samo pisani prijedlog vizije, strategije, mjera i akcija, nego je to živi program kojeg najbolje i jedino mogu formulirati i ostvariti znanstvenici. Stoga je razumljivo da je Vlada Republike Hrvatske odazivljajući se pozivu da sudjeluje u proslavi 50-te godišnjice Instituta "Ruđer Bošković" kroz okrugle stolove, odlučila da upravo na Institutu po prvi put javno iznese obrise i viziju strategije, tako da znanstvenici - u konkretnom slučaju suradnici IRB - od samog početka sudjeluju u kreiranju strategije. Strategija je proces, stvaralački proces, a strategija znanosti je temelj cjelokupne strategije. Često se govori o ekonomiji temeljenoj na znanju (Knowledge based economy). Prava poruka je: sve temeljeno na znanstvenom istraživanju. Da bi ova tvrdnja bila

oživotvorena potrebno je da znanstvenici budu njeni nosioci.

Znanstveno vijeće Instituta prišlo je izradi strategije i to je svakako jedan korak kojeg je nužno bilo napraviti ali nipošto nije i dovoljan. Ministarstvo znanosti i tehnologije je nedavno raspisalo natječaj za znanstvenoistraživačke projekte. Napravljeno je to u trenutku kada je Nacionalni program već istekao, a novi nije donešen. Dana je puna sloboda, ali naravno i odgovornost znanstvenicima da sami definiraju prioritete. Neke, one koji vole da im sve bude zapovjedbano ili zabranjeno to je zbunjivalo. Ali priroda znanstvenoistraživačkog rada je upravo sloboda. To je bio predmet glasovite Bernal - Polanyi polemike i to baš tijekom II. Svjetskog rata čiji je zaključak bio da znanstvenici odlučuju najbolje što i kako će raditi, a društvo stvara uvjete da se to najbolje ostvari: npr. planiranjem nabavke krupnih instrumenata, odlukom o osnivanju novih istraživačkih centara i sveučilišta, podržavanjem sustava vrednovanja, posebno napredovanja.

Proces predlaganja projekata je upravo u tijeku i već vidimo neke uspjehe ali i neke nedostatke. Nakana je bila i jest dati maksimalnu slobodu u predlaganju projekata i u prijedlogu organizacije kako optimalno organizacijski poduprijeti projekte. Pri tome se struktura Instituta, tj. zavodi ni na koji način ne diraju. Međutim, krutih pozicija ni na kojoj razini u istraživačkom sektoru više nema i naravno, ne smije biti. Svaki projekt i svaki zavod moraju predložiti i zalagati se da dobiju sve one suradnike koji su im potrebni. Najveću odgovornost imaju predlagatelji projekata, znanstveni savjetnici i viši znanstveni suradnici, te Znanstveno i Upravno vijeće Instituta.

Upravo na temelju te politike Upravno vijeće i Znanstveno vijeće bili su u stanju predložiti Ministarstvu izbor u zvanje znanstvenog suradnika za mnoge novake i asistente čije je napredovanje bilo neopravdano zamrznuto. Upravo na temelju ove politike prići ćemo novim prodorima kao što je nanoznanost ali i revitalizaciji dijelova IRB gdje smo uvijek bili i gdje moramo biti jaki, kao što su nuklearna fizika, nuklearna kemija i radiobiologija. U IRB predloženo je ukupno 120 projekata, a u cijeloj Hrvatskoj oko 2000. Da bi ti projekti bili maksimalno uspješni korisno ih je grupirati u grozdove koji se sastoje od projekata koji će sinergijskim vezama dati maksimalne rezultate i koji će biti bolje podržani.

Projekti - izvrsno predloženi i uspješno ostvareni projekti - su samo jedna komponenta društvene uloge Instituta. Nužno je na svim razinama poboljšati djelovanje Instituta i osigurati njegov maksimalni društveni angažman. Dva primjera koji doprinose tom angažmanu su: inovativni tehnološki projekti te nabavka nove opreme. Iako postoji akutna potreba za brojnom malom i srednjom opremom, ipak smo uspjeli

nabaviti i veću opremu - posebno NMR. Možda je najvažnije što je i na Institutu i u čitavoj zemlji inaugurirana nova politika: opremu mogu koristiti svi, ona nije vlasništvo nekih znanstvenika ni nekih laboratorija, nego je dostupna svima - naravno na temelju posebnih pravila korištenja te

DA BI TI PROJEKTI BILI MAKSIMALNO USPJEŠNI KORISNO IH JE GRUPIRATI U GROZDOVE KOJI SE SASTOJE OD PROJEKATA KOJI ĆE SINERGIJSKIM VEZAMA DATI MAKSYMALNE REZULTATE I KOJI ĆE BITI BOLJE PODRŽANI.

pravila koja osiguravaju financijsko održavanje te opreme.

Pred Institutom i pred svima nama stoje izuzetni zadaci:

- Moramo pokazati da je znanstvenoistraživačka djelatnost zaista generator cjelokupnog razvitka i to mora biti danas. To traži istraživače koji su izvrsni znanstvenici i koji su društveno angažirani. Istraživanje nije posao od 9 do 5, to je poziv. Kada u sustav istraživanja prihvatimo osrednje ili prepustimo znanstvenu instituciju osrednjima, onda se takvi u nemogućnosti da se bave zahtjevnim istraživanjima, bave intrigama.

- Uspješno obrazovanje osiguravaju uspješni znanstvenici. Povezivanje sa Sveučilištem u Osijeku je odličan primjer, ali treba analogno djelovati i na drugim našim sveučilištima, a posebno je naročito djelovati u Dubrovniku - posebno na stvaranju sveučilišta te u Varaždinu gdje se predviđa otvaranje prvog znanstvenotehnološkog parka. U Australiji je obrazovanje sada jedna od najvažnijih privrednih grana, te je ispred njihovih tradicionalnih izvoza vune i mesa. Izrael ulaže više u obrazovanje nego u obranu. Irska i Finska svrstale su se među najpropulzivnije zemlje samo na temelju istraživanja i obrazovanja.

- Ustrojstvo znanstvenoistraživačkog rada i obrazovnog sustava mora biti fleksibilno i maksimalno djelotvorno Institut mora i može pronaći najbolje načine ustrojstva.

- Inovativni tehnološki projekti su samo prvi korak. Svako dobro, svjetski priznato istraživanje predstavlja ekonomsku vrijednost i to treba dokazati. Istraživači mogu najbolje revitalizirati gospodarstvo - suvremeno gospodarstvo, koje se može danas, ali koje će se i sutra moći takmičiti sa svjetskim. To suvremeno gospodarstvo temeljeno na znanosti garantirat će i održivi razvoj.

Zalet prema World Wide Grid-u

Osvrt

Zadnja tri desetljeća neprekidno se odvijaju intenzivna istraživanja i razvoj koristeći pri tome postignutu razinu tehničkog i tehnološkog napretka s ciljem povećanja (ubrzavanja) računarske moći. Razvoj se odvija po eksponencijskoj dinamici, što se zorno uočava na činjenici da je znamenito računalo Cray X-MP instalirano 1986. godine, bez grafičkih mogućnosti, koštalo 8 milijuna \$, a radilo je uz posebno napajanje i hlađenje, te je bilo spojeno na druga superračunala brzinom od 64 kb/s. Danas naša djeca igraju igre na PC računalu s 3D grafikom, koje se brzinom od 128 kb/s spaja preko ISDN-a na Internet, a čija je računarska moć veća od X-MP-a, te košta samo 800 \$. Naša osobna računala su jača od NSF-ovih superračunala prije 15 godina.

Konstatacija

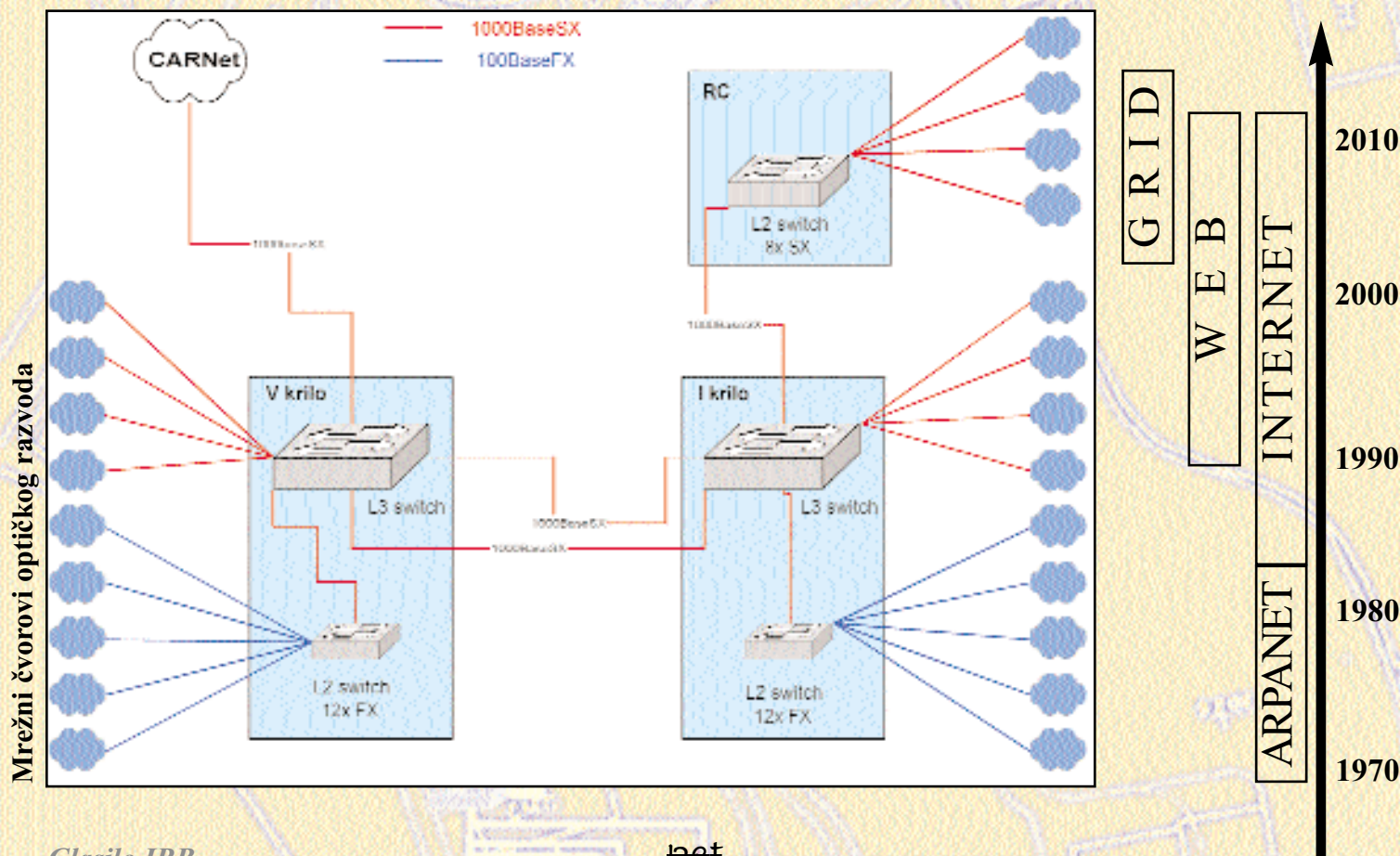
Unatoč tom snažnom razvoju, danas je kod mnoštva znanstvenih i tehničkih problema nemoguće provesti računarsku obradu i izračun sa složenim algoritmima na PC-ima, radnim stanicama ili brzim server računalima u smislenom vremenskom trajanju. Rješenje je u spajanju više procesora u para-

RAČUNALNI CENTAR INSTITUTA ZAVRŠAVA PROJEKTIRANJE MAGISTRALNE OPTIČKE RAČUNALNE MREŽE IZMEĐU 20 OBJEKATA S PRIPADAJUĆOM AKTIVNOM OPREMOM. PROJEKT SE RADI NA NAČIN DA SE MAKSIMALNO ZADOVOLJI BUDUĆI GRID STANDARD.

lelan rad, što dovodi do nastajanja superračunala, koja imaju veliku ulogu kod ubrzanog razvoja znanosti i tehnologije uz primjenu analitičkih i simulacijskih metoda te oblikovanja složenih modela u raznim područjima. Zahtjevnost računalne moći i memorijskog kapaciteta neprekidno raste, pa tako danas najveća superračunala sa više gigaFLOPS-a ne zadovoljavaju računarske potrebe suvremenih znanstvenih istraživanja.

Tendencija

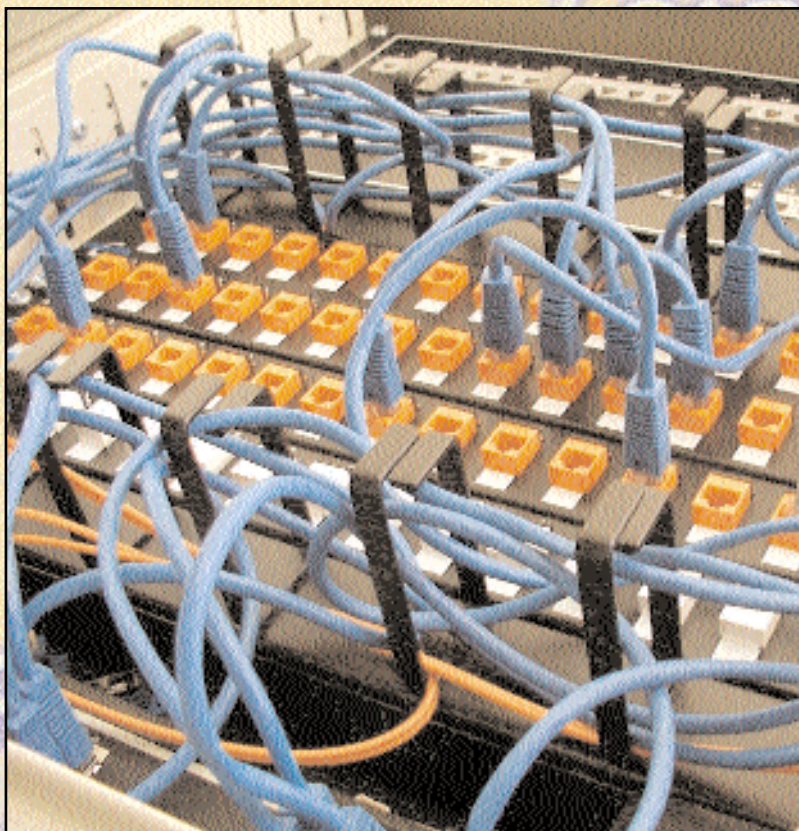
U svrhu rješavanja gore navedenih problema američki znanstvenici su započeli 1995. godine razvoj mrežnog povezivanja superračunala što je rezultiralo World Wide Grid-om (WWG) ili grid sustavom. Paralelni razvoj gigabitne (Gb) mreže i GHz računala stvorili su uvjete za uspostavljanje mrežno distribuiranog računarstva. Otvara se mogućnost nove



generacije računarstva čija je moć teraFLOPS-a s petabajtnim podacima u mrežnom spoju Gb brzine.

Od 2000. u cijelom svijetu se značajna sredstva ulažu u izgradnju nove grid paradigme koja ima posebno važno značenje u razvoju nacionalne strategije na području generičke informatičke tehnologije. To je nova računalno-mrežna tehnologija koja ne prenosi samo podatke i informacije, nego dijeli resurse uz pomoć brze mreže. Suština grid tehnologije se svodi na povezivanje različitih superračunala i cluster-računala s Gb brzom mrežom, kako bi se tvorilo novo jedinstveno virtualno superračunalo. Grid je zapravo skup metarračunala u distribuiranom okruženju s mogućnošću paralelnog rada čiji je konačni učinak značajno povećanja računalne moći na globalnim razinama. Očekuje se da će grid imati značajniju ulogu na polju obrade informacija nego što Web ima na dobavi informacija. Pretpostavlja da će društveno razvojni učinak grida biti izuzetno velik, te da će predstavljati sveobuhvatnu računalno-komunikacijsku mrežnu tehnologiju sličnu onoj koju električna mreža predstavlja u pogledu energetike (distribuirana energetika). Tako se stječu preduvjeti da se intraneti, virtualni laboratoriji, superračunala, clusteri, radne stanice, inteligentni znanstveni instrumenti povežu u funkcionalnu grid mrežu, u početku u većim znanstvenim/sveučilišnim institucijama, a vrlo brzo i u gospodarstvu.

U početku 90-ih godina, superračunala su prvenstveno koristili istraživački instituti i sveučilišta. Danas se preko 50 % superračunala nalazi u gospodarskim primjenama, a uočljiva je tendencija intenzivnog širenja cluster superračunala. Na taj se način interesna sfera sa znanstvenog istraživanja proširila na



gospodarski razvoj. Upravo u toj činjenici leži ogroman značaj budućeg grid sustava glede strategije razvoja na znanju utemeljenog gospodarstva. To je razlog zbog čega sve razvijene zemlje ulažu ogromna sredstva u izgradnju nacionalnog grid sustava, koji će se moći priključiti na međunarodni, odnosno globalni grid sustav.

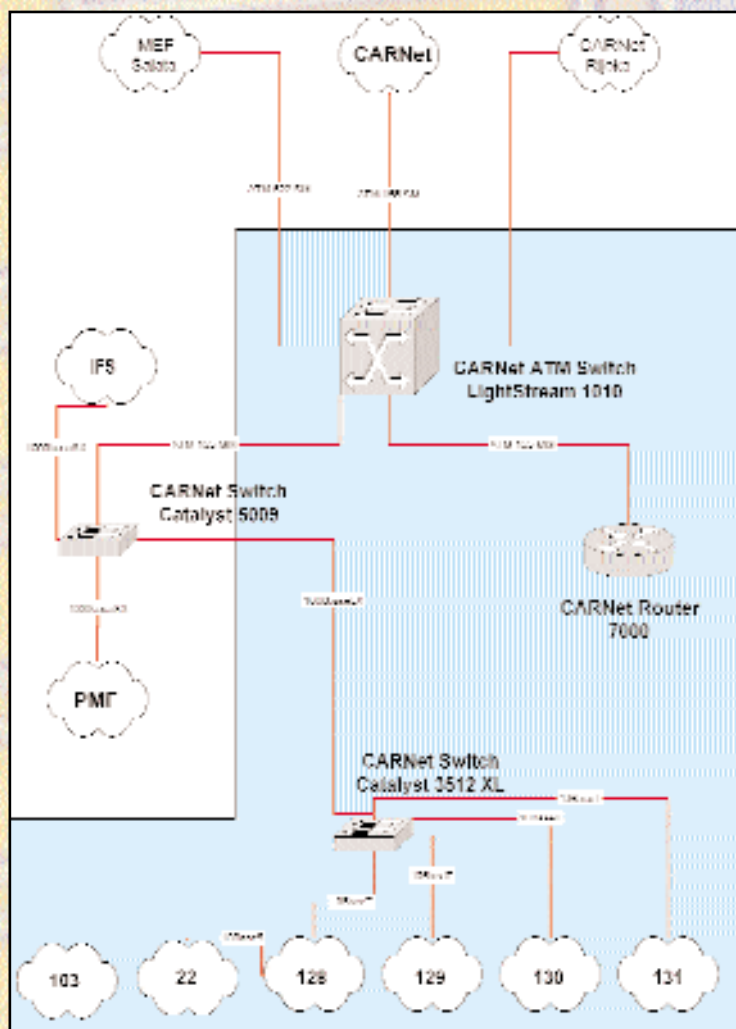
U razvijenim zemljama svaki značajniji institut/fakultet, kao i veći gospodarski subjekt je opremljen određenom vrstom superračunala. U tim zemljama nacionalni razvojni projekti su nadmašili superračunala i umjesto njih se intenzivno otvaraju veliki projekti koji su usmjereni povezivanju superračunala, gradeći pri tome nacionalni grid sustav (np. UK e-science program: 118 milijuna funti na 3 godine; u Americi se izgrađuje NSF Grid kapaciteta 13.6 teraFLOPS-a vrijednosti 53 milijuna dolara; a u Europi 15 zemalja gradi nacionalne Grid sustave koje čine EuroGrid projekt).

Inicijativa

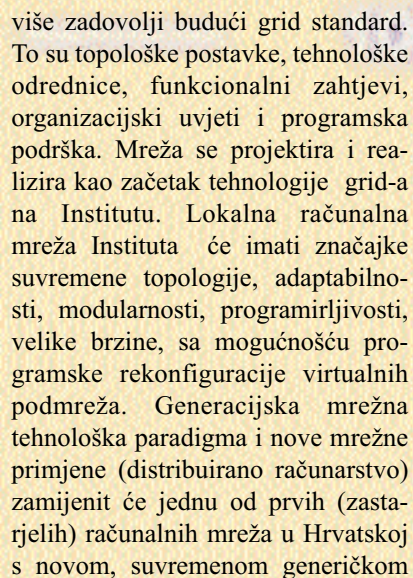
Hrvatska kasni preko godinu dana u pokretanju nacionalnog grid projekta, ali zahvaljujući dobroj mrežnoj infrastrukturi i aktivnostima u pojedinim institucijama moguće je brzo napredovanje sa Grid projektom i priključenje na DataGrid i EuroGrid projekte. Na taj način bi se osigurala nužna infrastruktura kao preduvjet za uključivanje u znanstvenoistraživački rad EU-e (six frame).

U tom smislu u Hrvatskoj radimo na konzorcijskom Grid projektu po principu integracije svih raspoloživih i zainteresiranih resursa u cilju što bržeg i kvalitetnijeg stjecanja znanja, tehnologije i uvjeta za izgradnju nacionalnog Grid sustava. Prema predviđanjima grid će pokrivati u početku kampus Horvatovac, a kasnije će se proširiti prema svim sveučilišnim i gospodarskim centrima.

Računalni centar Instituta završava projektiranje magistralne optičke računalne mreže između 20 objekata sa pripadajućom aktivnom opremom. Projekt se radi na način da se što je moguće



CARNet čvor na Institutu



Topologija mreže

certao: N. Kmetić

mežom, koja će imati izuzetan strateški značaj u informatizaciji znanstvenoistraživačkog rada u Institutu. To je temelj ostvarivanja programa znanstvenog orgvera (logističko-infrastrukturalna informatička podrška) u funkciji suvremenog multidisciplinarnog i multiinstitucionalnog znanstvenog rada.

Učínak

Učinak grid-a u znanstvenom radu se očituje prvenstveno u distribuiranom računarstvu izgradnjom povezane farme clustera, čime se omogućuje intenzivno računanje unutar velikih baza podataka, te se ostvaruje individualno i kolektivno napredovanje u znanju. S druge strane na vidiku je 3C (Computing Communication Collaboration) integracija, što dovodi do tehnologije teleprisutnosti (teleimmersion). To je sustav virtualne realnosti koji se u potpunosti ostvaruje u okolnostima grid infrastrukture. Predstavlja kompleksnu simbiozu tehnologije i

aplikacije iz koje proizlazi infrastruktura suradnja na daljinu, distribuirani design, nova znanstvena vizualizacija, suradničko inženjerstvo itd. Znanstveni instituti će postati generatori podataka iz inteligentnih znanstvenih instrumenata, nizova sofisticiranih senzora, robotiziranih eksperimentalnih aktuatora itd., iz kojih će se stvarati znanje na distribuiranim grid čvorovima na globalnoj razini. Nastajat će metabaze podataka i znanja i oživjet će globalna funkcionalna integracija u znanosti i znanstvenom radu.

Distribuirana integracija intelektualnog kapitala

Na prekretnici milenija u uvjetima nužnog demokratskog i integracijskog iskoraka potreba i izazov Hrvatske se očituje u činjenici da postoji značajan intelektualni kapital i stručna populacija ljudi koji su u stanju u globaliziranom svijetu Hrvatsku priključiti i preustrojiti razvijenim zemljama. Temelj razvoja nije genetsko nasljedstvo i izmjena energije, nego strujanje i oplodnja informacija temeljem intelektualnog kapitala. Stoga je nužno ostvariti informacijsko društvo koje se u životnoj zbilji temelji na znanju.

Novi demokratski društveni procesi, razvoj informacijske tehnologije i integracijske potrebe, stvaraju podlogu za tješnju suradnju, poglavito malih naroda. Polazeći od teze izrazitih nacionalnih i globalnih interesa u europskom prostoru, glede razvoja i suradnje, javlja se potreba za provedbom novog modela za ubrzavanje napretka, primjenom najsuvremenije grid informacijske tehnologije.

Kakvoća stvaralaštva oblikuje se znanstvenim obrazovnim procesom.



Društveni i tehnološki modeli (znanstvena stvaralačka logistika) trebaju omogućiti oplodnju tog stvaralaštva u obliku oplodnje stečenog intelektualnog kapitala. U uvjetima oskudnih materijalnih uvjeta rješenje je moguće u globaliziranim projektima koji se mogu ostvariti preko distribuiranih virtualnih laboratorija primjenom daljinskog suradništva. Treba stvoriti preduvjete da znanstvenici nakon prve faze informatizacije (računala, operacijski sustavi, lokalna i globalna mreža) imaju uvjete za daljinsku znanstveno-istraživačku suradnju u realnom i odgođenom vremenu. Treba omogućiti virtualnu kompresiju prostora u globaliziranom znanstvenoistraživačkom svijetu. Time bi bio obustavljen proces odlijeva mozgova i bila bi osigurana moguća provedba oplodnje intelektualnog kapitala, "sidrenjem" znanstvenika u Hrvatskoj s aktivnim znanstvenim djelovanjem u globalnim razmjerima pomoću grida.

Perspektiva

Prema gore navedenom treba posebno istaknuti korisnost u smislu akceleriranja i udomljenja svjetskih generičnih tehnologija, razvoj domaćih kadrova i znanja, kao i stvaranje preduvjeta za integraciju u međunarodnu grid mrežu. U suprotnom, Hrvatska će neminovno zaostati u znanosti i gospodarstvu, jer se kriteriji vrhunskih rezultata danas temelje na primjeni superračunala, a sutra će to biti primjena grid tehnologija. Dakle, uloga izgradnje grid-a je dvojaka: s jedne

Računalna mreža u brojkama

optički kabel, 24-nitni, dužina	600 m
optički kabel, 8-nitni, dužina	3000 m
UTP razvodni kabel	130 km
Razvodni ormar visine 42U	3 kom
Razvodni ormar visine 19U	7 kom
Razvodni ormar visine 12U	5 kom
Switch 8port SX	2 kom
Switch 12port UTP	3 kom
Switch 12port FX	2 kom
Switch 24port UTP	1 kom
Switch 48port UTP	17 kom
Optički switch moduli	33 kom

strane diseminacija tehnologije jeftinih cluster superračunala, a s druge strane istraživanja i razvoj na području grid tehnologija s ciljem izgradnje funkcionalnog grid sustava s kojim ćemo se moći integrirati s razvijenim zemljama u tehnološkom smislu. *Stoga je zalet prema World Wide Grid-u temeljna generička strategija informatičkog razvoja Instituta i cijele Hrvatske.*

Paralelno računanje

Opis clustera grozd.irb.hr

Operacijski sustav na clusteru grozd.irb.hr je adaptirana verzija RedHat Linuxa v7.1, prilagodjena za rad u distribuiranim/paralelnim sustavima. Promjene u odnosu na klasični RedHat su u dodatnim programskim alatima koji omogućuju lakše administriranje i nadzor nad radnim čvorovima, kao i vrlo praktičan način prilagođavanja programske podrške specifičnim lokalnim potrebama. Informacije o radnim čvorovima (njihove MAC adrese, imena, informacije o korisnicima sustava i sl.) drže se u SQL-bazi iz koje se, uz pomoć alata iz ROCKS clustering sustava, brzo generiraju aktualne konfiguracije svih potrebnih mrežnih servisa (NIS, NFS, NTP i sl.). Pored toga, ugrađen je moćan sustav za izradu distribucije programskih paketa i njenu instalaciju na sve čvorove.

Programska podrška

RedHat 7.1 + ROCKS Linux clustering toolkit (<http://rocks.npaci.edu>)

RedHat Linux baziran je na RPM (Redhat Package Manager) paketnom sustavu. Većina znanstvenih aplikacija distribuira se u RPM formi, a drugačije programske pakete moguće je (relativno jednostavno) pretvoriti u RPM paket. Za pakete koji traže dodatnu prilagodbu našim potrebama, sustav ROCKS omogućuje definiranje parametara za instalaciju pojedinih paketa, i dodavanje skripti koje se izvršavaju prije i poslije instalacije pojedinog paketa (npr. podešavanje konfiguracijskih fileova tog paketa našim potrebama).

Administracija sustava

Administracija sustava uvelike je olakšana programskim paketima koje donosi ROCKS clustering toolkit. Pregled nad instaliranim programima i nadzor rada čvorova vrši se centralizirano, s frontalnog čvora. Jednom jedinom naredbom moguće je potpuno reinstalirati jedan ili više radnih čvorova, koji u roku nekoliko minuta postaju spremni za rad. Dodavanje novog čvora (i njegovo instaliranje) također je vrlo jednostavno. Dovoljno je pokrenuti skriptu na frontalnom čvoru koja će na DHCP zahtjev sa stroja koji se boota, informaciju o njegovoj MAC adresi dodati u SQL-bazu, te automatski podesiti parametre NIS, NFS i ostalih servisa na frontalnom čvoru. Administriranje korisničkih računa na frontalnom čvoru vrši se primjenom određene skripte, koja automatski ažurira NIS bazu, kao i NFS exporte korisničkih direktorija. Takav automatizam omogućuje da promjene korisničkih računa na frontalnom čvoru postanu odmah aktualne na svim radnim čvorovima.

Sustav iz korisnikove perspektive

Na sustav grozd.irb.hr korisnik se spaja isključivo preko secure shell protokola (ssh). Njegov home-direktorij je preko NFS-a exportiran na sve radne čvorove u sustavu, što znači da su korisnikovi fileovi kreirani na frontalnom čvoru, njemu automatski dostupni na bilo kojem čvoru u sustavu. To je praktično npr. kod

korištenja specifičnih biblioteka koje nisu instalirane na sistemskoj razini, a posebno pri korištenju batch-sustava. Na taj način njegovoj aplikaciji, koja se izvršava na radnim čvorovima, dostupne su biblioteke iz korisnikovog home-direktorija (u većini slučajeva to podrazumijeva adekvatnu konfiguraciju aplikacije koja koristi takve biblioteke). Na svakom radnom čvoru postoji /scratch particija (veličine 15 GB) koju korisnički programi mogu koristiti za međurezultate. Korisniku su, pored već instaliranih aplikacija, na raspolaganju MPI i PVM biblioteke za razvoj vlastitih paraleliziranih programa. Na sustav je instaliran i PBS batch-sustav s Maui upraviteljem koji brine o pravednom i učinkovitom rasporedu korisničkih poslova (jobova). Više o PBS-u i načinu na koji se podnosi zahtjev za obradom može se naći na <http://cluster.irb.hr>.

Po čemu se cluster razlikuje od skupa neovisnih računala?

Cluster nije precizno definiran pojam pa se čak i skup nezavisnih računala može smatrati clusterom ukoliko postoji neki minimalan vid i stupanj integracije. Ipak, clusterom se uobičajeno smatra sustav računala sa specifičnom programskom podrškom koja daje visok stupanj integracije čvorova i pretvara ih efektivno u jedinstven višeprosesorski sustav, u mjeri u kojoj je to fizički moguće. Neizbježna heterogenost arhitekture jedino je po čemu se cluster razlikuje od jedinstvenog višeprosesorskog sustava. U slučaju našeg pilot-clustera integracija je postignuta alatima iz sustava Rocks kao i raznim paketima za razvoj i izvršavanje paraleliziranih aplikacija kao i već gotovim paraleliziranim aplikacijama.

Paralelno programiranje

Kako pomoću MPI biblioteka napraviti program koji se paralelno izvršava?

Local Area Multicomputer - LAM

Jedan od alata koji MPI aplikacijama omogućava izvršavanje na clusteru računala zove se LAM koji je instaliran na clusteru grozd.irb.hr.

Da bismo svojoj aplikaciji omogućili da se pomoću MPI-a paralelizira na clusteru računala, potrebno je kreirati datoteku u koju su upisana imena svih čvorova u clusteru na koje želimo da se naša aplikacija 'proširi'. Za cluster grozd.irb.hr to izgleda npr. ovako:

```
$ cat lam-hosts
# lam-hosts
frontend-0
compute-0-0
compute-0-1
compute-0-2
compute-0-3
```

Zatim je potrebno pokrenuti LAM daemone na spomenutim čvorovima:

```
$ lamboot -v lam-hosts
```



```
Executing hboot on n0 (frontend-0 - 1 CPU)...
Executing hboot on n1 (compute-0-0 - 1 CPU)...
Executing hboot on n2 (compute-0-1 - 1 CPU)...
Executing hboot on n3 (compute-0-2 - 1 CPU)...
Executing hboot on n4 (compute-0-3 - 1 CPU)...
topology done
$
```

Sada imamo spremnu radnu okolinu za pokretanje i izvršavanje procesa paraleliziranih MPI-jem na više radnih čvorova (računala).

Najjednostavniji primjer

Za primjer uzmimo program koji se 'proširi' sa po jednim procesom na svaki radni čvor, i svaki proces ispisuje "Tu sam!" na STDOUT:

```
#include <stdio.h>
#include <mpi.h>

int main (int argc, char *argv[]) {

    int myrank, size;

    MPI_Init(&argc, &argv);                /* Inicijalizacija MPI-a */
    MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &myrank); /* Dohvacanje 'mog' ranga */
    MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &size);    /* Dohvacanje ukupnog broja procesora (procesa) */
    printf("Procesor %d od %d: Tu sam!\n", myrank, size);
    MPI_Finalize();                          /* Terminacija MPI-a */
}
```

Funkcija `MPI_Init` inicijalizira MPI okolinu i kreira komunikator `MPI_COMM_WORLD`. Argumenti su joj zapravo argumenti od funkcije `main`, a to je broj procesora na koliko će program raditi. Te argumente automatski postavlja naredba `mpirun` (vidi dolje). Funkcija `MPI_Comm_rank` u varijablu `myrank` pohranjuje vlastiti rang procesa unutar komunikatora `MPI_COMM_WORLD`. Funkcija `MPI_Comm_size` pohranjuje ukupan broj procesa unutar komunikatora `MPI_COMM_WORLD` varijablu. Gornje tri funkcije se gotovo u svim prilikama koriste upravo kao u gornjem primjeru. One naprosto služe za 'orijentaciju' pojedinog procesa. Pomoću njih proces dohvaća ukupan broj procesa, i njegov rang među njima. `MPI_Finalize()` služi za 'završavanje' MPI okoline i uvijek se stavlja na kraj programa.

Kompiliranje MPI programa

Kompiliranje MPI programa vrši se naredbom `hcc`. To je ustvari wrapper za lokalni `c` compiler... (vidi man `hcc`).

Kako bi preveli naš primjer koristimo slijedeće:

```
$ hcc -o prvi prvi.c -lmpi
```

Pokretanje MPI programa

Za pokretanje MPI programa služi naredba `mpirun`. Kako bi pokrenuli na program upisujemo:

```
$ mpirun -w N ./prvi
```

Kao rezultat dobivamo slijedeće:

```
Procesor 0 od 5: Tu sam!
Procesor 2 od 5: Tu sam!
Procesor 1 od 5: Tu sam!
Procesor 4 od 5: Tu sam!
Procesor 3 od 5: Tu sam!
Za opcije naredbe mpirun vidi 'man mpirun'.
```

Napomena: Više o MPI-ju, kao i ostalim stvarima vezanim uz paralelizirano programiranje može se naći na http://foxtrot.ncsa.uiuc.edu:8900/webct/public/show_courses.pl

ICMAN- 1st International Conference on Mechanisms of Action of Nutraceuticals

Cavtat-Dubrovnik, 14-19. 10. 2001.

U Cavtatu je od 14. do 19. listopada 2001. godine organiziran skup pod nazivom ICMAN - 1st International Conference on Mechanisms of Action of Nutraceuticals. Organizatori: dr. Miroslav Čolić (ZPM inc./Molecutec LLC, USA), dr. Krešimir Pavelić (Institut "Ruđer Bošković", Zavod za molekularnu medicinu, Zagreb) i dr. Hans J. Seitz (Univerzitet u Hamburgu, Njemačka) cjelokupni su program podijelili u nekoliko odvojenih cjelina, koje su bile tematski povezane.

Rezultati primjene nekih nutraceutika u kemoprevenciji raka (R. Agarwal, SAD; Mukhtar H, SAD; Wenzel U, Njemačka) odlično su prikazani na dobro definiranim eksperimentalnim modelima karcinoma prostate i debelog crijeva korištenjem suvremenih metoda molekularne genetike. Na sličan način prikazana je i primjena nutraceutika u kardiologiji, s posebnim naglaskom na mehanizme djelovanja prirodnih i sintetičkih antioksidansa, odnosno vitamina E (E. Niki, Japan; M. Aviram, Izrael; R.J Schaur, Austrija). Terapijsko djelovanje malih molekula na razini nukleinskih kiselina i proteina prikazano je s dva vrlo informativna i odlično prezentirana predavanja (P. Stambrook i T. Haqqi, SAD). U ovoj je sekciji zapaženo predavanje imala A. Pfeifer, direktorica Istraživačkog centra kompanije Nestle, koja je (neupućenima) objasnila što je to "funkcionalna hrana" sa znanstvenog, razvojnog i komunikacijskog gledišta.

S obzirom na to da neurodegenerativne bolesti sve više predstavljaju javno-zdravstveni problem, snažan naglasak stavljen je na zaštitno djelovanje i primjenu nutraceutika u neuroprotektivne svrhe. Tako je, na primjer, zaštitno djelovanje polifenila 3,3'- epigalokatehin-3 galata, dobivenog iz ekstrakta zelenog čaja, praćeno metodom DNA-čipova (microarray) na stanicama neuroblastoma miša (M. Youdim, Izrael). Djelovanje melatonina i vitamina E, u ovoj je sekciji također bilo prikazano s dva odlična predavanja (R. Reiter, USA; R. Brigelius-Flohe, Njemačka). U nizu kasnijih, kraćih predavanja izneseni su rezultati kontroliranih kliničkih studija vezanih uz djelovanje pripravka ENADA (G. Birkmayer, Austrija; V. Demarin, Hrvatska, G.K: Kay, SAD; M. Moline, SAD).

Zadnji dan Konferencije bio je posvećen djelovanju i primjeni nutraceutika u šećernoj bolesti. Prikazan je začuđujući in vivo model spontanog razvoja ove bolesti u životinje *Psammomys obesus* kojoj su davani različiti nutraceutički pripravci kako bi došlo do regresije bolesti. Patofiziologija bolesti, kao mogući mehanizmi djelovanja nutraceutika provjereni su dobro poznatim metodama molekularne biologije (N. Kaiser, Izrael). Na ovo su se predavanje nadovezala još tri, jednako zanimljiva (S. Sasson, Izrael; M. Hadžija, Hrvatska; V. Profozić, Hrvatska).

Rasprava za okruglim stolom, koja se održavala zadnji dan Konferencije, bila je u potpunosti posvećena problemima koji se nužno javljaju u ovakvim tipovima istraživanja. Dodatno se raspravljalo i o problemima vezanim uz registraciju nutraceutika i pomoćnih ljekovitih sredstava. Zaključeno je da se kontinuitet Konferencije pod ovim imenom treba nastaviti; slijedeća će se održati slijedeće godine u Austriji, Krems.

Iako su neki pozivni predavači otkazali svoje sudjelovanje zbog katastrofe koja je zadesila New York, sve sekcije predstavljale su zaokružene cjeline. Naravno, mjesto održavanja Konferencije, Cavtat, kao i neposredna blizina Dubrovnika na obali najljepšeg mora na svijetu, ovoj su Konferenciji dali poseban ugođaj koji je dodatno bio uljepšan prekrasnim, sunčanim danima tijekom njezina trajanja. I na kraju, čestitke osoblju hotela "Croatia", koje je i ovaj put pokazalo iznimnu srdačnost i nadasve visok stupanj profesionalnosti.

S obzirom na to da neurodegenerativne bolesti sve više predstavljaju javno-zdravstveni problem, snažan naglasak stavljen je na zaštitno djelovanje i primjenu nutraceutika u neuroprotektivne svrhe. Tako je, na primjer, zaštitno djelovanje polifenila 3,3'- epigalokatehin-3 galata, dobivenog iz ekstrakta zelenog čaja, praćeno metodom DNA-čipova (microarray) na stanicama neuroblastoma miša (M. Youdim, Izrael).

Srebrna plaketa "Josip Lončar"

Na svečanosti koja je održana 21. studenog 2001. prigodom obilježavanja Dana Fakulteta, na Fakultetu elektrotehnike i računarstva, Sveučilišta u Zagrebu, na prijedlog Povjerenstva za nagrađivanje djelatnika i studenata, a prema odluci Fakultetskog vijeća Fakulteta Elektrotehnike i računarstva Zagreb od 16.10. 2001. godine dodijeljena je:

Dr. Jadranki Pečar-Ilić, znanstvenom novaku (voditelj prof.dr.sc. Ivica Ružić) u Zavodu za istraživanje mora i okoliša, Instituta "Ruđer Bošković"

Srebrna plaketa "Josip Lončar" za istaknutu doktorsku disertaciju u 2001. godini.

Dr. Jadranka Pečar-Ilić obranila je svoju doktorsku disertaciju pod naslovom:

INFORMACIJSKI SUSTAV ZA VREMENSKO-PROSTORNI PRIKAZ SLOŽENIH PODATAKA

pod mentorstvom prof.dr.sc. Zorana Skočira na Zavodu za telekomunikacije Fakulteta elektrotehnike i računarstva, Sveučilišta u Zagrebu, 28. rujna 2001. godine kada je i stekla stručni naziv doktora tehničkih znanosti iz znanstvenog polja Elektrotehnika.

Plaketa je dodijeljena zbog:

"posebnog doprinosa u originalnim rješenjima integracije različitih izvora prostorno-vremenskih podataka", i

"činjenici da su originalni znanstveno-istraživački rezultati primijenjeni u okviru Dunavskog međunarodnog programa zaštite okoliša (EPDRB), čime je dan doprinos afirmaciji Republike Hrvatske u području informacijskih i komunikacijskih tehnologija".



Digitalne knjižnice i informacijska znanost - treće mjesto

Voditeljica knjižnice Instituta "Ruđer Bošković" mr. sc. Jadranka Stojanovski je za rad "Croatian current research programs and projects scientific output - the library role" osvojila treće mjesto u natjecanju "Digitalne knjižnice i informacijska znanost" za 2001.g. Ovo natjecanje za informacijske stručnjake iz zemalja u razvoju organizira Američko udruženje za informacijsku znanost i tehnologiju (ASIST). ASIST je udruženje sa članstvom od 4000 informacijskih specijalista iz područja računalnih znanosti, lingvistike, menadžmenta, knjižničarstva, inženjerstva, prava, medicine, kemije i obrazovanja; stručnjaka sa zajedničkim interesom unapređivanja načina kojima će društvo pohranjivati, pretraživati, analizirati i diseminirati informacije. Mr. sc. Stojanovski je dobila dvogodišnje članstvo u ASIST-u, a njezin rad će biti objavljen u Bulletin of ASIST ili u časopisu International Information and Library Review, Academic Press.